

## NO<sub>x</sub>와 Monoethanolamine(MEA) 간의 반응성 계산

심재구\*, 김준한, 이지현, 장경룡, 전영호<sup>1</sup>, 김자현<sup>1</sup>  
한전 전력연구원; <sup>1</sup>승실대학교  
(jgshim@kepri.re.kr\*)

화력발전소 배가스에 포함된 NO<sub>x</sub>와 이산화탄소 흡수제로 사용되는 MEA 간의 반응성을 고찰하기 위하여 양자역학 계산을 수행하였다. 계산 결과, NO<sub>2</sub>는 MEA와 반응성이 없지만, dinitrogen tetroxide(N<sub>2</sub>O<sub>4</sub>)나 dinitrogen pentoxide(N<sub>2</sub>O<sub>5</sub>)는 HNO<sub>2</sub>나 HNO<sub>3</sub>을 생성시키며 MEA와 화학결합을 형성하는 것이 가능하였다. N<sub>2</sub>O<sub>4</sub>는 NO<sub>2</sub>의 이합체이며, N<sub>2</sub>O<sub>5</sub>는 NO<sub>2</sub>와 NO<sub>3</sub>로 분해되기 때문에, 결국 MEA는 NO<sub>2</sub>를 고정하는 셈이다. 또한, 물 분자와 N<sub>2</sub>O<sub>4</sub>도 반응하여 HNO<sub>3</sub>와 HNO<sub>2</sub>를 형성하는 것으로 알려져 있지만, 계산 결과, 반응에너지가 매우 작았으며, 이는 많은 양의 물분자가 수용액에 존재하지만 효과적인 NO<sub>2</sub>제거를 위하여 다른 흡수제 화학물이 필요하다는 사실과도 부합한다.